Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:
Navn: Jan Myrheim
Telefon: 73 59 36 53 (mobil 90 07 51 72)

Eksamen i fag FY1004 Innføring i kvantemekanikk
Tirsdag 22. mai 2007
Tid: 9.00–15.00

Sensurfrist: Tirsdag 12. juni 2007

Tillatte hjelpemidler: Kalkulator, matematiske tabeller.

Alle deloppgaver teller likt ved sensuren.

Noen nyttige konstanter:	
Lyshastigheten i vakuum:	$c = 299\,792\,458\,\text{m/s}$
Permeabiliteten i vakuum:	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\,\text{N/A}^2$
Permittiviteten i vakuum:	$\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2) = 8,854 \times 10^{-12}\,\text{F/m}$
Den reduserte Plancks konstant:	$\hbar = 1,055 \times 10^{-34}\,\text{J s}$

Oppgave 1:

Et hydrogenlikt atom har ett elektron med masse m og ladning $-e$ som er bundet til en atomkjerne med ladning Ze. Siden kjernen har mye større masse enn elektronet, antar vi at den ligger i ro i origo, og at bare elektronet beveger seg. Her ser vi bort fra egenspinnet til elektronet.
Den potensielle energien til elektronet i posisjonen $\vec{r}$ er gitt ved Coulomb-potensialet

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \;, \tag{1}$$

der $r = |\vec{r}|$. Hamilton-operatoren for elektronet er

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 + V(r) \;. \tag{2}$$

a) Vis at når $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, er

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} \;, \qquad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} \;, \qquad \frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} \;.$$

Bruk det til å vise at for en vilkårlig funksjon $f = f(r)$ er

$$\nabla^2 f(r) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) f(r) = f''(r) + \frac{2}{r}\,f'(r) \;.$$

b) Vis at for en bestemt verdi av konstanten β er bølgefunksjonen

$$\psi_0(\vec{r}) = N_0\, \mathrm{e}^{-\beta r}\ ,$$

med en normeringskonstant N_0, en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen

$$H\psi_0 = E_0\psi_0\ .$$

Uttrykk den spesielle verdien av β ved Bohr-radien a_0, definert som

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2 m}\ .$$

Hva er energien E_0 for denne tilstanden?

Er pariteten positiv eller negativ?

Denne tilstanden er faktisk grunntilstanden til atomet. Hvilken egenskap (eller hvilke egenskaper) er det bølgefunksjonen ψ_0 har som kan tyde på at den er grunntilstanden?

c) Vis at for en bestemt verdi av konstanten γ er bølgefunksjonen

$$\psi_1(\vec{r}) = N_1\, x\, \mathrm{e}^{-\gamma r}\ ,$$

med en normeringskonstant N_1, en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen

$$H\psi_1 = E_1\psi_1\ .$$

Uttrykk γ ved Bohr-radien a_0.

Hva er energien E_1 for denne tilstanden, og hva er pariteten?

d) To andre løsninger av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen med den samme energien E_1 er

$$\psi_2(\vec{r}) = N_1\, y\, \mathrm{e}^{-\gamma r}\ , \qquad \psi_3(\vec{r}) = N_1\, z\, \mathrm{e}^{-\gamma r}\ .$$

Vis at de tre tilstandene ψ_1, ψ_2 og ψ_3 er ortogonale, at for eksempel

$$\int \mathrm{d}^3\vec{r}\, (\psi_1(\vec{r}))^*\, \psi_2(\vec{r}) = 0\ .$$

En naturlig fysisk tolkning av de tre tilstandene er at de er orientert henholdsvis langs x-aksen, y-aksen og z-aksen. Hvorfor?

(Tenk for eksempel på hvor det er størst og minst sannsynlighet for å finne elektronet.)

e) Det er mer vanlig å klassifisere tilstandene til hydrogenatomet ved hjelp av hovedkvantetallet n og dreieimpulskvantetallene ℓ og m_ℓ. En bølgefunksjon karakterisert ved disse kvantetallene kan faktoriseres i en radialfunksjon R og en vinkelfunksjon Y, slik:

$$\psi_{n\ell m_\ell}(r,\theta,\varphi) = R_{n\ell}(r)\, Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)\ .$$

Polarkoordinatene (r,θ,φ) er definert ved at

$$x = r\sin\theta\cos\varphi\ , \qquad y = r\sin\theta\sin\varphi\ , \qquad z = r\cos\theta\ .$$

De sfærisk harmoniske funksjonene $Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)$ er egenfunksjoner for $\vec{L}^{\,2}$ og L_z med egenverdier henholdsvis $\ell(\ell+1)\hbar^2$ og $m_\ell\hbar$, der $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ er banedreieimpulsen til elektronet. De normeres slik at vinkelintegralet av $|Y_{\ell m_\ell}|^2$ er lik 1:

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}(\cos\theta) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi\, |Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)|^2 = 1\ .$$

Bølgefunksjonene for $n = 2$ og $\ell = 1$ har formen

$$\psi_{21m_\ell}(r,\theta,\varphi) = N_2\, r\, \mathrm{e}^{-\gamma r}\, Y_{1m_\ell}(\theta,\varphi)\ ,$$

der N_2 er en normeringskonstant. De sfærisk harmoniske funksjonene med $\ell = 1$ er

$$\begin{aligned} Y_{11}(\theta,\varphi) &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\ , \\ Y_{10}(\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\cos\theta\ , \\ Y_{1,-1}(\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\ . \end{aligned}$$

Skriv ψ_{211}, ψ_{210} og $\psi_{21,-1}$ som lineærkombinasjoner av bølgefunksjonene ψ_1, ψ_2 og ψ_3 definert ovenfor under punktene c) og d).

Vi velger normeringskonstantene N_1 og N_2 som positive reelle tall, og normeringskravet til en bølgefunksjon $\psi(\vec{r})$ er at

$$\int \mathrm{d}^3\vec{r}\, |\psi(\vec{r})|^2 = 1\ .$$

Det er ikke nødvendig å regne ut eksplisitte uttrykk for konstantene N_1 og N_2.

Oppgave 2:

Også i denne oppgaven ser vi på bevegelsen til et elektron i et hydrogenlikt atom, beskrevet av Hamilton-operatoren H gitt i ligningene (1) og (2) i forrige oppgave.

a) Anta at den tidsuavhengige bølgefunksjonen $\psi = \psi(\vec{r})$ er en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen, $H\psi = E\,\psi$, der E er energien.

Anta videre at tilstanden til elektronet ved tiden $t = 0$ er $\Psi(\vec{r},0) = \psi(\vec{r})$.

Vis at da er tilstanden til elektronet ved en vilkårlig tid t gitt ved den tidsavhengige bølgefunksjonen

$$\Psi(\vec{r},t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\,\psi(\vec{r})\ .$$

Selv om bølgefunksjonen $\Psi(\vec{r},t)$ er tidsavhengig, kaller vi dette en stasjonær tilstand. Hvorfor?

Bølgefunksjonen $\Psi = \Psi(\vec{r},t)$ er en løsning av den tidsavhengige Schrödinger-ligningen

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Psi = H\Psi\ .$$

Er den også en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen $H\Psi = E\Psi$? Begrunn svaret.

b) Anta at $\Psi_a(\vec{r},t)$ og $\Psi_b(\vec{r},t)$ er to forskjellige stasjonære tilstander med to forskjellige energier $E_a < E_b$,

$$\Psi_a(\vec{r},t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_a t}\;\psi_a(\vec{r})\;, \qquad \Psi_b(\vec{r},t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_b t}\;\psi_b(\vec{r})\;.$$

La $\Phi = \Phi(\vec{r},t)$ være en superposisjon av disse to stasjonære tilstandene,

$$\Phi(\vec{r},t) = c_a\Psi_a(\vec{r},t) + c_b\Psi_b(\vec{r},t)\;,$$

med konstante komplekse koeffisienter $c_a \neq 0$ og $c_b \neq 0$.

Er Φ en løsning av den tidsavhengige Schrödinger-ligningen?

Er Φ en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen?

Er Φ en stasjonær tilstand? Begrunn svarene.

c) La Φ være den samme superposisjonen av to stasjonære tilstander, og vis at hvis A er en hvilken som helst observabel (Hermitesk operator) som ikke avhenger eksplisitt av tiden t, så har forventningsverdien av A i tilstanden Φ, definert som

$$\langle A\rangle_t = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\;\left(\Phi(\vec{r},t)\right)^*\left(A\,\Phi(\vec{r},t)\right)\;,$$

en tidsavhengighet som er periodisk. Finn perioden T slik at

$$\langle A\rangle_{t+T} = \langle A\rangle_t\;.$$

Siden forventningsverdien $\langle A\rangle_t$ i tilstanden Φ er periodisk med periode T for enhver observabel A (som ikke er eksplisitt tidsavhengig), er det naturlig å si at tilstanden Φ er periodisk med periode T. At perioden er T, vil si at frekvensen er $f = 1/T$ og at vinkelfrekvensen er $\omega = 2\pi/T$.

I følge *klassisk* elektromagnetisk teori vil en elektrisk ladning, for eksempel et elektron, som beveger seg periodisk med periode T og frekvens $f = 1/T$, sende ut elektromagnetisk stråling med den samme frekvensen f.

Sammenlign med det *kvantemekaniske* uttrykket for frekvensen til den elektromagnetiske strålingen som elektronet sender ut når det hopper fra energinivået E_b til det lavere nivået E_a. Kommentar?

Oppgave 3:

Anta at vektorene $|j,k\rangle$ med $j = 0,1,2,\ldots$ og $k = 0,1,2,\ldots$ er ortonormale basisvektorer i et uendeligdimensjonalt Hilbert-rom. At de er ortonormale, betyr at for $j,k,m,n = 0,1,2,\ldots$ er

$$\langle j,k|m,n\rangle = \delta_{j,m}\,\delta_{k,n} = \begin{cases} 1 & \text{for} \quad j=m \quad \text{og} \quad k=n\;, \\ 0 & \text{ellers}\;. \end{cases}$$

De fire operatorene a, $a^\dagger$, b og $b^\dagger$ virker slik på basisvektorene:

$$\begin{aligned} a\,|j,k\rangle &= \sqrt{j}\;|j-1,k\rangle\;, \qquad & a^\dagger\,|j,k\rangle &= \sqrt{j+1}\;|j+1,k\rangle\;, \\ b\,|j,k\rangle &= \sqrt{k}\;|j,k-1\rangle\;, \qquad & b^\dagger\,|j,k\rangle &= \sqrt{k+1}\;|j,k+1\rangle\;. \end{aligned}$$

a) Vis at kvantetallene j og k som karakteriserer tilstandsvektoren $|j,k\rangle$, er egenverdier til operatorene $a^\dagger a$ og $b^\dagger b$, altså at

$$a^\dagger a\,|j,k\rangle = j\,|j,k\rangle\ , \qquad b^\dagger b\,|j,k\rangle = k\,|j,k\rangle\ .$$

At Hilbert-rommet har en basis som består av felles egentilstander for operatorene $a^\dagger a$ og $b^\dagger b$, sier noe om kommutatoren $[a^\dagger a, b^\dagger b]$. Hva sier det?

Vis kommutasjonsrelasjonene $[a,a^\dagger]=1$ og $[b,b^\dagger]=1$.

Vis dem f.eks. ved å undersøke først hvordan kommutatoren $[a,a^\dagger]=aa^\dagger - a^\dagger a$ virker på en vilkårlig basisvektor $|j,k\rangle$, og deretter hvordan den virker på en vilkårlig tilstandsvektor $|\psi\rangle$, som er en lineærkombinasjon av basisvektorene med komplekse koeffisienter:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{\infty} c_{jk}\,|j,k\rangle\ .$$

b) Vi kan la basisvektorene $|j,k\rangle$ representere energiegentilstander til en todimensjonal harmonisk oscillator som er isotrop, det vil si at den svinger med samme frekvens i alle retninger. Foucault-pendelen i Realfagbygget kan tjene som et konkret eksempel (bortsett fra at den har et drivverk for at den ikke skal stoppe på grunn av friksjonen, og at svingeplanet roterer i forhold til Realfagbygget, som er et roterende koordinatsystem).

Hamilton-operatoren for oscillatoren er

$$H = \frac{1}{2m}\,(p_x^{\,2}+p_y^{\,2}) + \frac{1}{2}\,m\omega^2\,(x^2+y^2)\ .$$

m er massen til partikkelen, (x,y) er posisjonen i planet, (p_x,p_y) er impulsen, og ω er vinkelfrekvensen til oscillatoren. En karakteristisk lengde for oscillatoren er

$$\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\ .$$

Sammenhengen mellom operatorene x, y, p_x, p_y og a, $a^\dagger$, b, $b^\dagger$ er at

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} + \mathrm{i}\,\frac{\ell}{\hbar}\,p_x\right), \qquad & a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} - \mathrm{i}\,\frac{\ell}{\hbar}\,p_x\right),\\ b &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{y}{\ell} + \mathrm{i}\,\frac{\ell}{\hbar}\,p_y\right), \qquad & b^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{y}{\ell} - \mathrm{i}\,\frac{\ell}{\hbar}\,p_y\right). \end{aligned} \tag{3}$$

Hamilton-operatoren kan uttrykkes ved operatorene a, $a^\dagger$, b, $b^\dagger$ som

$$H = \hbar\omega\,(a^\dagger a + b^\dagger b + 1)\ .$$

Følgelig er tilstandsvektoren $|j,k\rangle$ en egentilstand til H,

$$H\,|j,k\rangle = \hbar\omega\,(j+k+1)\,|j,k\rangle\ .$$

Egenverdiene til H, som er energinivåene til oscillatoren, er altså

$$E_n = \hbar\omega\,(n+1)\ , \qquad \text{med} \qquad n = 0,1,2,\dots\ .$$

Hva er degenerasjonen (antallet tilstander) for energinivået E_n?

Skriv opp et uttrykk for den mest generelle tilstanden som har energi E_n.

Vis at (de unormerte) tilstandsvektorene $a^\dagger b\,|j,k\rangle$ og $b^\dagger a\,|j,k\rangle$ har samme energi som tilstandsvektoren $|j,k\rangle$.

Hva forteller det om kommutatorene $[a^\dagger b, H]$ og $[b^\dagger a, H]$? Begrunn svaret.

(Kom eventuelt tilbake til dette spørsmålet etter at du har svart på neste punkt.)

c) Vis kommutasjonsrelasjonen

$$[a^\dagger b, b^\dagger a] = a^\dagger a - b^\dagger b \; .$$

En måte å gjøre det på, er å bruke «Leibniz-reglene» for å kommutere med et produkt:

$$[A, BC] = [A, B]\, C + B\, [A, C] \; , \qquad [AB, C] = [A, C]\, B + A\, [B, C] \; ,$$

sammen med formlene $[a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = 1$, $[a, b^\dagger] = [b, a^\dagger] = [a, b] = [a^\dagger, b^\dagger] = 0$.

Følgende relasjoner kan vises på tilsvarende måte (men du behøver ikke vise dem her):

$$[a^\dagger b, a^\dagger a] = -a^\dagger b \; , \qquad [a^\dagger b, b^\dagger b] = a^\dagger b \; , \qquad [b^\dagger a, a^\dagger a] = b^\dagger a \; , \qquad [b^\dagger a, b^\dagger b] = -b^\dagger a \; .$$

d) Ved hjelp av operatorene a, $a^\dagger$, b, $b^\dagger$ definerer vi nå følgende tre Hermiteske operatorer:

$$K_1 = \frac{\hbar}{2}\,(a^\dagger a - b^\dagger b) \; , \qquad K_2 = \frac{\hbar}{2}\,(a^\dagger b + b^\dagger a) \; , \qquad K_3 = -\mathrm{i}\,\frac{\hbar}{2}\,(a^\dagger b - b^\dagger a) \; .$$

Av kommutasjonsrelasjonene ovenfor følger det at K_1, K_2 og K_3 alle kommuterer med Hamilton-operatoren H, og at de kommuterer innbyrdes på samme måte som dreieimpulsoperatorer:

$$[K_1, K_2] = \mathrm{i}\hbar K_3 \; , \qquad [K_2, K_3] = \mathrm{i}\hbar K_1 \; , \qquad [K_3, K_1] = \mathrm{i}\hbar K_2 \; .$$

Bevis forlanges ikke her.

Vis (ved hjelp av ligning (3)) at

$$K_3 = \frac{1}{2}\,(x p_y - y p_x) = \frac{L_z}{2} \; ,$$

der L_z er z-komponenten av dreieimpulsen i tre dimensjoner (en rotasjon i xy-planet er en rotasjon om z-aksen hvis vi tenker på planet som et todimensjonalt underrom av det tredimensjonale rommet).

Hva kan du si om de mulige egenverdiene til K_3 og L_z, ut fra kommutasjonsrelasjonene mellom K_1, K_2 og K_3?